

(19) BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

(12) **Offenlegungsschrift**
(11) **DE 3717480 A1**

(51) Int. Cl. 4:

C07D 239/48

A 01 N 43/54
A 01 N 47/20
C 07 D 405/12
C 07 D 403/12
C 07 D 401/12
C 07 D 409/12
C 07 D 401/14
C 07 D 403/14
C 07 D 405/14
C 07 D 409/14
// (C07D 239/48,
207:06,207:32,211:14,
213:36,307:14,307:52,
333:20,263:56)

(14)

(21) Aktenzeichen: P 37 17 480.0
(22) Anmeldetag: 23. 5. 87
(23) Offenlegungstag: 1. 12. 88

(71) Anmelder:

Shell Agrar GmbH & Co KG, 6507 Ingelheim, DE

(74) Vertreter:

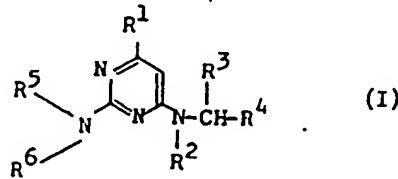
Jung, E., Dipl.-Chem. Dr.phil.; Schirdewahn, J.,
Dipl.-Phys. Dr.rer.nat.; Gemhardt, C., Dipl.-Ing.,
Pat.-Anwälte, 8000 München

(72) Erfinder:

Mengel, Rudolf, Dipl.-Chem. Dr., 6535
Gau-Algesheim, DE; Schröder, Ludwig, Dipl.-Chem.
Dr., 6507 Ingelheim, DE; Stransky, Werner,
Dipl.-Chem. Dr., 6535 Gau-Algesheim, DE; Linden,
Gerbert, Dipl.-Landw. Dr., 6507 Ingelheim, DE;
Schneider, Gerhart, Dipl.-Biol., 6109 Mühlthal, DE

(54) Neue herbizid und mikrobizid wirksame 2,6-Diaminopyrimidine

Es werden herbizid und mikrobizid wirksame 2,6-Diamino-
pyrimidine der Formel



in der R¹ bis R⁶ die im Text genannten Bedeutungen haben,
sowie ein Verfahren zur Synthese dieser Verbindungen be-
schrieben.

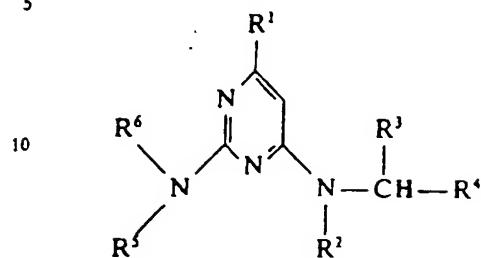
E 3717480 A1

DE 3717480 A1

Patentansprüche

1. Verbindungen der Formel

5



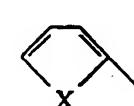
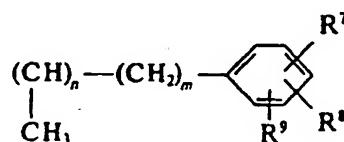
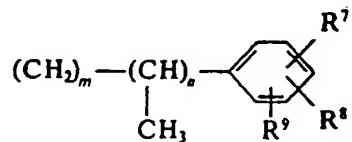
15

sowie deren Salze mit Säuren und Metallkomplexe in der

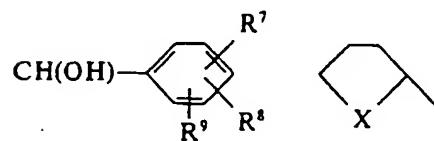
18 R^1 Halogen, Niederalkyl, Halogenniederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyloxy,
 R^2 Wasserstoff, Niederalkyl,

20 R^3 Wasserstoff, Niederalkyl, phenylsubstituiertes Niederalkyl, gegebenenfalls substituiertes Phenyl,

25



30



35

m 0, 1, 2, 3

n 0, 1,

X S, NH, N CH₃, C=N,

40



45

$CH_2, CH_2CH_2, O,$

R^3 und R^4 gemeinsam $-CH_2-CH(C_6H_5)-$,
 R^5 Wasserstoff, gegebenenfalls halogensubstituiertes Alkyl mit bis zu 15 C-Atomen, ggf. subs.

R^6 Cyclopropyl, Alkenyl mit bis zu 4 C-Atomen
 R^5 und R^6 Wasserstoff, Niederalkyl, $-COR^3$

50

R^7 gemeinsam eine gegebenenfalls ein- oder mehrfach niederalkylsubstituierte $-(CH_2)_p-$ Gruppe mit $p = 4$ oder 5,

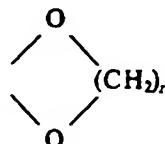
R^8 Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Niederalkylthio, Halogenniederalkylthio, gegebenenfalls substituiertes Phenyl, gegebenenfalls substituiertes Phenoxy, gegebenenfalls substituiertes Benzyl, Di-niederalkylamino, NO₂, SO₂NR²R³, CH₃SO₂, Di-niederalkylaminocarbonyloxy

55

R^9 die gleich oder verschieden sein können, Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy,

R^8 und R^9 gemeinsam

60



65

mit $z = 1, 2$.

R^5 nicht für Wasserstoff oder Ethyl steht, wenn
 R^1 Chlor
 R^2, R^3, R^6 Wasserstoff und
 R^4 unsubstituiertes Phenyl

bedeutet.

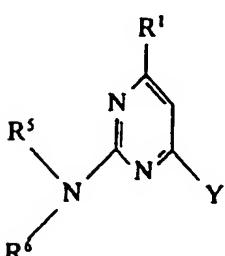
2. Herbizides Mittel, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff mindestens ein Pyrimidinderivat der Formel I, Anspruch 1 enthält.

3. Mikroherbizides Mittel, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff mindestens eine Verbindung der Formel I, Anspruch 1 enthält.

4. Verwendung von Verbindungen nach Anspruch 1 bei der Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwachstums.

5. Verwendung von Verbindungen nach Anspruch 1 bei der Verhütung und Bekämpfung von Mikroorganismenbefall auf Kulturpflanzen.

6. Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I, dadurch gekennzeichnet, daß ein Pyrimidin der Formel



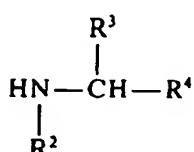
(II)

20

25

worin R^1 , R^5 und R^6 die obigen Bedeutungen haben und Y für eine nucleophil austauschbare Gruppe steht, mit einem Amin der Formel

30



(III)

35

in der R^2 , R^3 und R^4 die obigen Bedeutungen haben, nach an sich bekannten Verfahren umgesetzt.

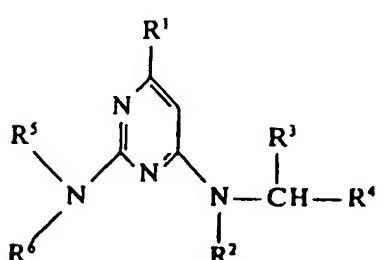
Beschreibung

40

Die Erfindung betrifft neue Pyrimidinderivate, ihre Herstellung, herbizide und mikroherbizide Mittel, die diese Pyrimidine enthalten sowie ihre Verwendung bei der Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwachstums und bei der Verhütung und Bekämpfung von Mikroorganismenbefall auf Kulturpflanzen.

45

Es wurde gefunden, daß die neuen 2,6-Diaminopyrimidine der Formel



(I)

50

55

sowie deren Salze mit Säuren und deren Metallkomplexe, gegen zahlreiche Unkräuter und Ungräser stark wirksam sind.

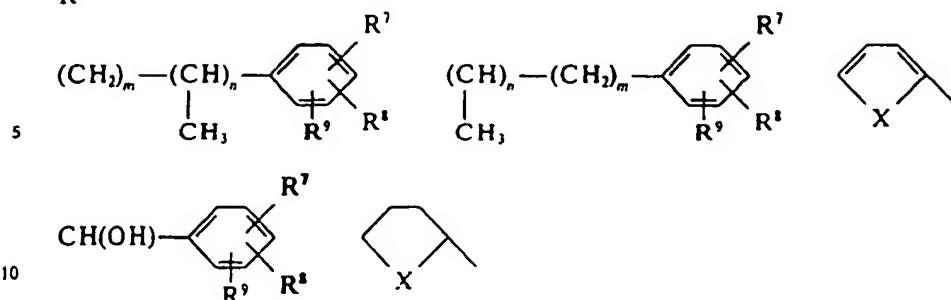
60

In der obigen Formel und im folgenden bedeutet

R^1 Halogen, Niederalkyl, Halogenniederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyloxy,
 R^2 Wasserstoff, Niederalkyl,

R^3 Wasserstoff, Niederalkyl, phenylsubstituiertes Niederalkyl, gegebenenfalls substituiertes Phenyl,

65

R⁴

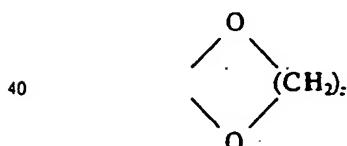
m 0, 1, 2, 3
 n 0, 1,
 15 X S, NH, NCH₃, C=N.



25 R³ und R⁴ CH₂, CH₂—CH₂, O
 R⁵ gemeinsam —CH₂—CH(C₆H₅)—,
 Wasserstoff, gegebenenfalls halogensubstituiertes Alkyl mit bis zu 15 C-Atomen, ggf. subs. Cyclopropyl, Alkenyl mit bis zu 4 C-Atomen

30 R⁶ Wasserstoff, Niederalkyl, —COR³
 R⁵ und R⁶ gemeinsam eine gegebenenfalls ein- oder mehrfach niederalkylsubstituierte —(CH₂)_p—Gruppe mit p = 4 oder 5,
 R⁷ Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy, Hydroxy, Mercapto, Cyano, Niederalkylthio, Halogenniederalkylthio, gegebenenfalls substituiertes Phenyl, gegebenenfalls substituiertes Phenoxy, gegebenenfalls substituiertes Benzyl, Di-niederalkylamino, NO₂, SO₂NR²R³, CH₃SO₂, Di-niederalkylaminocarbonyloxy

35 R⁸ und R⁹ die gleich oder verschieden sein können, Wasserstoff, Halogen, Niederalkyl, Niederalkyloxy, Halogenniederalkyl, Halogenniederalkyloxy,
 R⁸ und R⁹ gemeinsam



mit z = 1, 2.

45 mit der Einschränkung, daß

R⁵ nicht für Wasserstoff oder Ethyl steht, wenn
 R¹ für Chlor
 50 R², R³, R⁶ für Wasserstoff und
 R⁴ für unsubstituiertes Phenyl

steht.

55 Niederalkyl ist im Rahmen der obigen Definition bevorzugt eine geradkettige oder verzweigte Gruppe dieser Art mit bis zu 4 Kohlenstoffatomen, also Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, sek-Butyl, iso-Butyl und tert-Butyl. Dies gilt auch, soweit der Niederalkylrest Bestandteil einer Alkoxy- oder Alkylthiogruppe ist. Hervorzuheben sind Methyl, Methoxy und Methylthio.

55 Alkylgruppen umfassen Niederalkylreste nach vorstehender Definition oder aber geradkettige oder verzweigte Kohlenstoffketten mit bis zu 15 Kohlenstoffatomen. Bevorzugte Gruppen sind Neopentyl-, Hexyl und Dodecyl. Die Alkylgruppen können gegebenenfalls mit bis zu 10 Halogenatomen substituiert sein.

Unter Halogen sind Fluor, Chlor, Brom und Jod zu verstehen, vor allem Fluor, Chlor und in zweiter Linie Brom.

65 Mit Halogenniederalkyl, Halogenniederalkoxy und Halogenniederalkylthiosten sind Gruppen gemeint, deren Niederalkylteil wie zuvor definiert ist und mit 1 bis 6 Halogenatomen, die gleich oder verschieden sein können, substituiert ist.

Bevorzugt sind die Trifluormethyl-, Trichlormethyl-, Difluormethyl-, Dichlormethyl-, Fluormethyl-, Chloromethyl-, Brommethyl-, 2,2,2-Trifluoroethyl-, 2,2,2-Trichloroethyl-, Monochlorodifluormethyl- und Dichloromonofluormethyl-

Alkenylgruppen sind die Vinyl, Allyl und die verschiedenen isomeren Butenylradikale.
Die neuen Verbindungen werden nach an sich bekannten Verfahren hergestellt, indem man ein Pyrimidin der Formel



worin R^1 , R^5 und R^6 die obigen Bedeutungen haben und Y für eine nucleophil austauschbare Gruppe, wie Halogen, vorzugsweise aber Chlor und Brom steht, mit einem Amin der Formel



in der R^2 , R^3 und R^4 die obigen Bedeutungen haben, umsetzt.

Die Umsetzung erfolgt zweckmäßig in einem unter den Reaktionsbedingungen inerten Lösungsmittel bei Siedetemperatur, wobei es vorteilhaft ist, eine organische oder anorganische Base als säurebindendes Mittel zuzusetzen, bevorzugt ist Triethylamin. Das Pyrimidin (II) und das Amin (III) können in äquimolaren Mengen eingesetzt werden. Zur Verkürzung der Reaktionszeit wird bevorzugt ein Überschub an Amin (III) verwendet.

Verbindungen der Formel I, in denen R^6 für die Gruppe COR^3 steht können zweckmäßigerweise auch durch an sich bekannte Umsetzung von Verbindungen der Formel I, in denen R^6 für Wasserstoff steht mit reaktiven Carbonsäurederivaten der Formel



in denen Z für eine nucleophil austauschbare Gruppe, wie z. B. Halogen, $\text{R}^3 \text{---} \text{COO} \text{---}$ oder gemischte Anhydride steht, erhalten werden.

Die als Ausgangsprodukte verwendeten Pyrimidinderivate der Formel (II) und die Amine der Formel (III) sind literaturbekannt oder können nach analogen Verfahren hergestellt werden.

Die Verbindungen der Formel I sind herbizid und mikrobiel wirksam.

Mann kann sie vor und insbesondere nach dem Auflaufen gegen zahlreiche Unkräuter und Ungräser einsetzen. Zu nennen sind hier besonders:

Amaranthus retroflexus	Sida spinosa	40
Abutilon theophrasti	Sinapis arvensis	
Bidens pilosa	Stellaria medica	
Cassia tora	Veronica persicaria	
Centaurea cyanus	Veronica hederaefolia	
Datura stramonium	Xanthium pensylvanicum	
Desmodium tortuosum	Alopecurus myosuroides	
Galium aparine	Avena fatua	
Ipomoea purpurea	Achniochloa crus-galli	
Ipomoea hederacea	Echinochloa colonum	
Ipomoea aconitifolia	Eleusine indica	45
Lamium purpurea	Digitaria sanguinalis	
Lamium amplexicaule	Cynodon dactylon	
Lapsana communis	Leptochloa filiformis	
Portulaca oleracea	Sorghum halepense	
	Setaria viridis	55

Neben der bei hohen Konzentrationen möglichen Anwendung als Totalherbizid erlaubt die gute Selektivität bei niedrigen Konzentrationen die Unkraut- bzw. Ungrasbekämpfung in zahlreichen Kulturen; beispielsweise in Weizen, Gerste und anderen Getreidearten, in Mais, Sorghum, Reis, Zuckerrohr, Soja, Baumwolle, Zuckerrübe, Kartoffel, Raps u. a.

Für die Anwendung werden die Verbindungen der Formel I in an sich bekannter Weise mit üblichen Hilfs- und Trägerstoffen zu gebräuchlichen Formulierungen verarbeitet, z. B. zu Emulsionskonzentraten oder Suspensionspulvern, bei denen der Wirkstoffgehalt zwischen 10 und 95 Gewichtsprozent liegt und die für die Ausbringung mit Wasser bis zur gewünschten Wirkstoffkonzentration verdünnt werden. Jedoch können auch unverdünnt anwendbare Präparate in Form von Stäuben und Granulaten hergestellt werden. Bei diesen Mitteln liegt der Wirkstoffgehalt zwischen 0,1 und 10 Gewichtsprozent, vorzugsweise zwischen 0,3 und 3 Gewichtspro-

5 Als Trägerstoffe kommen beispielsweise Kaolin, Talcum, Kreide, Aluminiumsilikate, Getreidemehl, Cellulosepulver, Holzmehl u. a. in Frage. Als Dispergatoren finden Kondensationsprodukte des Naphthalins bzw. der Naphthalinsulfosäuren mit Phenol und Formaldehyd, Salze der Ligninsulfosäure, Salze sulfatierter Hexa-, Hepta-, Octadecanole u. a. Verwendung. Silicone empfehlen sich als Antischaummittel. Als Lösungsmittel lassen sich Wasser, Alkohole, aromatische Kohlenwasserstoffe, Dimethylsulfoxid, Mineralöle und Pflanzenöle verwenden.

Formulierungsbeispiele (Angabe der Zusammensetzung in Gewichtsprozent)

10

1) Emulsionskonzentrat

15

10%	einer Verbindung der Formel I
40%	Pflanzenöl
10%	Nonylphenolpolyglykolether
40%	Cyclohexanon

20

2) Suspensionspulver

25

25%	einer Verbindung der Formel I
55%	Kaolin
10%	kolloidale Kieselsäure
9%	Calciumligninsulfonat
1%	Natriumtetrapropylbenzolsulfonat

30

3) Suspensionspulver

35

95%	einer Verbindung der Formel I
4%	Calciumligninsulfonat
1%	Natriumtetrapropylbenzolsulfonat

4) Stäubemittel

40

0,3%	einer Verbindung der Formel I
1,0%	Methylcellulose
98,7%	Talcum

Aus den Konzentraten 1 bis 3 werden durch Vermischen mit Wasser Spritzbrühen hergestellt, die im allgemeinen zwischen 0,005 und 0,5% Wirkstoff enthalten.

Überraschenderweise zeigen die erfindungsgemäßen Verbindungen ein äußerst günstiges Mikrobizid-Spektrum gegen phytopathogene Pilze und Bakterien. Sie besitzen kurative, präventive und systemische Eigenschaften und lassen sich zum Schutz von Kulturpflanzen einsetzen.

Erfindungsgemäße Wirkstoffe lassen sich besonders vorteilhaft gegen folgende Klassen phytopathogener Pilze einsetzen: Ascomyceten, Basidiomyceten, Fungi imperfecti und Phytomyceten.

Folgende Pflanzenarten kommen als behandelungsfähig in Betracht: Getreide, Kern-, Stein- und Beerenobst, Hülsenfrüchte, Ölkulturen, Gurkengewächse, Fasergewächse, Citrusfrüchte, Gemüsearten, Lorbeergewächse, Mais, Tabak, Nüsse, Kaffee, Zuckerrohr, Tee, Weinreben, Hopfen, Bananen und Naturkautschukgewächse sowie Compositen.

Wirkstoffe der allgemeinen Formel I können gleichzeitig oder nacheinander mit weiteren Wirkstoffen auf die zu behandelnde Fläche oder an die Pflanze gegeben werden, wobei diese weiteren Wirkstoffe Präparate, die das Pflanzenwachstum beeinflussen oder Pflanzenschutzmittel sein können.

Für die Anwendung werden die erfindungsgemäßen Verbindungen, gewünschtenfalls auch die Salze, in üblicher Weise mit Hilfs- und/oder Trägerstoffen zu gebräuchlichen Formen von Schädlingsbekämpfungsmitteln verarbeitet, z. B. zu Lösungen, Lösungs- bzw. Emulsionskonzentraten, Suspensionspulvern, Stäuben, Emulsionen. Die Konzentrate werden vor der Anwendung gegebenenfalls mit Wasser verdünnt, so daß Spritzbrühen mit einem Wirkstoffgehalt zwischen etwa 0,005 und 1 Gewichtsprozent erhalten werden. Bei der Anwendung als Low-Volume- oder Ultra-Low-Volume-Formulierung kann der Wirkstoffgehalt auch erheblich höher sein (bis 20 bzw. 50 Gewichtsprozent). Bevorzugte Applikationsformen sind die Blattapplikation, Bodenapplikation und das Coating der Samenkörner.

60 Beispiele für erfindungsgemäße Formulierungen:

1. Suspensionspulver

65 20 Gew.-Teile einer Verbindung nach Formel I

20 Gew.-Teile Kaolin

5 Gew.-Teile Natriumsulfat

2 Gew.-Teile Schädlingsbekämpfungsmittel

1 Gew.-Teile Diisobutylnaphthalin-natriumsulfonat (Netzmittel)
43 Gew.-Teile Kieselkreide

Die Bestandteile werden vermahlen und das Mittel wird für die Anwendung in so viel Wasser suspendiert, daß die Wirkstoffkonzentration etwa 0,005 bis 0,5 Gewichtsprozent beträgt. 5

2. Emulsionskonzentrat

15 Gew.-Teile einer Verbindung nach Formel I
10 Gew.-Teile Dodecylbenzolsulfonsäure-triäthylaminsalz
75 Gew.-Teile Dimethylformamid 10

Die Herstellung der Verbindung der Formel I wird anschließend näher erläutert. Entsprechend dem gegebenen Beispiel können die in Tabelle 1 aufgeführten Pyrimidine der Formel (I) erhalten werden. 15

Beispiel 1

2-Amino-4-chlor-6-(p-chlorbenzyl)aminopyrimidin MGL 1949

65 g 2-Amino-4,6-dichlorpyrimidin werden zusammen mit 84 ml Triethylamin und 85 g 4-Chlorbenzylamin in 20 600 ml Ethanol 12 Stunden zum Sieden erhitzt. Nach Abdestillieren des Lösungsmittels wird mit 700 ml Wasser verrieben, der Rückstand abgesaugt und aus Toluol umkristallisiert.

Ausbeute: 67 g (62,2%) 2-Amino-4-chlor-6-(p-chlorbenzyl)-aminopyrimidin als Kristallpulver vom Schmp. 162°C. 25

Elementaranalyse:

Ber. C: 49,10% H: 3,75% N: 20,81%
Gef. C: 48,75% H: 3,67% N: 20,70%

Die in Tabelle 1 aufgeführten Verbindungen können analog dargestellt werden. 30

35

40

45

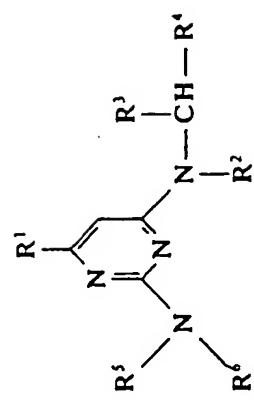
50

55

60

65

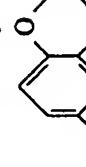
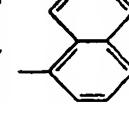
Tabelle 1



in- Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
	O—CH ₃	H	H	C ₆ H ₅	H	H	Fp: 124°C
	O—CH ₃	H	H	CH ₂ —C ₆ H ₅	H	CH ₃	
Cl		H	H	2-Cl—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 165°C
Cl		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 161°C
CF ₃		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
O—CH ₃		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
O—CF ₃		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
F		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
Cl		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 162°C
CF ₃		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
O—CH ₃		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
O—CF ₃		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
F		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
Cl		H	H	4-F—C ₆ H ₄	H	H	
CH ₃		H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	H	
CH ₃		H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	H	

bin- Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
1	Cl	H	H	4-Br—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 186°C
1	Cl	H	H	2,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 205°C
1	O—CH ₃	H	H	2,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
1	CF ₃	H	H	2,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
1	Cl	H	H	3,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 159°C
1	O—CH ₃	H	H	3,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
1	CF ₃	H	H	3,4-Cl ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
1	Cl ₂ H ₃	CH ₃	H	3-(CH ₃)—O—C ₆ H ₄	CH ₃		
1	Cl	H	H	3-(CH ₃)—O—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 139°C
1	O—CF ₃	H	H	3-(CH ₃)—O—C ₆ H ₄	H	H	
1	Cl	H	H	3-(CH ₃)—O—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 111°C
1	Cl	H	H	CH ₃ —[4-(CH ₃ O)—C ₆ H ₄] _n	H	H	Fp: 146°C
1	Cl	H	H	4-(CH ₃)—O—C ₆ H ₄	CH ₃ (CH ₂) _n	H	Fp: 53°C
1	Cl	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	CH ₃ (CH ₂) _n	H	
1	Cl	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	(CH ₂) _n C—CH ₃	H	
1	Cl	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	(CH ₂) _n C—CH ₃	H	
1	Cl	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	(CH ₂) _n C—CH ₃	H	
1	Cl	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	Fp: 147°C
1	Cl	H	H	3-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	
1	O—CF ₃	H	H	3-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	Fp: 100°C
1	CH ₃	H	H	4-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	Fp: 174°C
1	Cl	H	H	4-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	
1	O—CF ₃	H	H	4-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	
1	CF ₃	H	H	4-CH ₃ —C ₆ H ₄	H	H	Fp: 160°C
2	Cl	H	H	4-[(CH ₂) _n C]—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 132°C
2	Cl	H	H	4-[(CH ₂) _n C]—C ₆ H ₄	H	H	

OS 37 17 480

in- Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
CF ₃	H	H	H	3,5-(CH ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 132°C
Cl	H	H	H	3,5-(CH ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
Cl	H	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	—(CH ₃) ₂ —		
Cl	H	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	—(CH ₃) ₂ —		
O—CF ₃	H	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	—(CH ₃) ₂ —		
Cl	H	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	—(CH ₃) ₂ —		
Cl	H	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	—(CH ₃) ₂ —		
Cl	H	H	H		H	H	Fp: 168°C
O—CF ₃	H	H	H	3,5-(CF ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	
CF ₃	H	H	H	3,5-(CF ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 135°C
Cl	H	H	H	3,5-(CF ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 203°C
Cl	H	H	H	3,4,5-(CH ₃ O) ₃ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 115°C
Cl	H	H	H	3(C ₆ H ₃ O)—C ₆ H ₃	H	H	Fp: 160°C
Cl	H	H	H	CH ₃ —[4-(OH)—C ₆ H ₄](CH ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 89°C
Cl	H	H	H	CH ₂ —[2-Cl—C ₆ H ₄](CH ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 138°C
Cl	H	H	H	CH ₂ —[3-ClF ₂ —C ₆ H ₄](CH ₃) ₂ —C ₆ H ₃	H	H	Fp: 120°C
Cl	H	H	H	CH(CH ₃) ₂ C ₆ H ₃	H	H	Fp: 117°C
					H	H	Fp: 189°C

Verbin- dung Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
2	CF ₃	H	H		CH ₃	CH ₃	Fp: 199°C
3	Cl	H	CH ₃		H	H	Öl
4	Cl	H	H	CH ₂ —C ₆ H ₅	H	H	Fp: 112°C
5	CF ₃	H	CH ₃		C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	
6	CF ₃	CH ₃	H		CH ₃	CH ₃	
7	CF ₃	H	H		CH ₃	H	Fp: 134°C
8	Cl	H	CH ₃ C ₆ H ₅		CH ₃	H	Öl
9	Cl	CH(CH ₃) ₂	H		CH ₃	H	Fp: 132°C
0	Cl	H	H		CH ₃	C ₆ H ₅	
1	CF ₃	H	H		CH ₃	C ₆ H ₅	
2	Cl	H	H		CH ₃	C ₆ H ₅	
3	Cl	H	H	4-CH ₃ O—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 89°C Fp: 112°C
4	CF ₃	H	H		H	H	Fp: 199°C
5	Cl	H	H		C ₆ H ₅	H	Fp: 123°C
6	CF ₃	H	H		H	H	

min. § Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten:
O—CH ₃	H	H	H		H	H	
Cl	H	H	H		H	H	Fp: 142°C
CH ₃	H	H	H		H	H	
CF ₃	H	H	H		H	H	
CCl ₃	H	H	H		H	H	
Cl	H	H	H		H	H	Fp: 111°C
O—CF ₃	H	H	H		H	H	
O—CH ₃	H	H	H		H	H	
Cl	H	H	H		H	H	Fp: 180°C
Cl	H	H	H		H	H	Fp: 199°C

Arabin- ing Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
87	Cl	H	H		H	H	Fp: 207°C
88	Cl	H	CH ₃		H	H	Öl
89	Cl	H	H		H	H	
90	Cl	H	H	4(CF ₃ O)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 137°C
91	Cl	H	H	(CH ₃) ₂ —C ₆ H ₅	H	H	Fp: 84°C
92	Cl	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	CHO	
93	CF ₃	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	CHO	
94	OCF ₃	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	CHO	
95	Cl	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	C ₆ H ₅		
96	Cl	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	CHO	
97	Cl	H	H	3-Cl—C ₆ H ₄	H	CH ₃ CO	
98	Cl	H	H	4-Cl—C ₆ H ₄	H	CH ₃ CO	
99	Cl	H	H	4-(H ₂ NSO ₂)C ₆ H ₄	H	H	Fp: 198°C
00	CF ₃	H	H	4-(H ₂ NSO ₂)C ₆ H ₄	H	C ₂ H ₅ CO	
01	Cl	H	H	3-(NO ₂)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 164°C
02	Cl	H	H	C ₆ H ₅	H	H	Fp: 134°C
03	Cl	H	H	4 ClC ₆ H ₄	C ₆ H ₅	H	Fp: 89°C
04	Cl	H	H	CH(OH)—C ₆ H ₅	H	H	Fp: 159°C

zählig. Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
;	Cl	H			H	H	Öl Fp: 116°C
;	Cl	H			H	H	Fp: 86°C
1	Cl	H			H	H	Fp: 107°C
2	Cl	H	C ₆ H ₅		C ₂ H ₅	H	Fp: 78°C
3	Cl	H	C ₆ H ₅		C ₂ H ₅	H	Fp: 146°C
4	Cl	H	4-Cl ₂ O—C ₆ H ₄		C ₂ H ₅	H	Fp: 71°C
5	Cl	H	Cyclohexyl		C ₂ H ₅	H	Fp: 217°C
6	Cl	H	3-CF—C ₆ H ₄		C ₂ H ₅	H	Fp: 90°C
7	Cl	H	C ₆ H ₅		C ₂ H ₅	H	Fp: 75°C
8	Cl	H	4-CF ₃ O—C ₆ H ₄		C ₂ H ₅	H	Fp: 163°C
9	Cl	H			C ₂ H ₅	H	Fp: 121°C
10	Cl	H			C ₂ H ₅	H	Fp: 63°C
11	Cl	H			C ₂ H ₅	H	Fp: 176°C
12	Cl	H			(CH ₃) ₂ CH	H	Öl
13	Cl	H			H	H	Fp: 143°C
14	Cl	H			H	H	(CH ₃) ₂

Verbin- dung Nr.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	physikalische Daten
22	Cl	H	H	3,4-(OCH ₃)C ₆ H ₃	H	H	Fp: 181°C
23	Cl	H	H	4-(C ₆ H ₅)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 177°C
24	Cl	H	H	4-(OH)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 164°C
25	Cl	H	H	3,5-(Cl ₃)—C ₆ H ₃	H	H	Fp: 139°C
26	Cl	H	H	4-(NH ₂)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 142°C
27	Cl	H	H	4-(CH ₃ OOC)—C ₆ H ₄	H	H	Fp: 176°C
28	Cl	H	H	3-(Cl)4-(F)—C ₆ H ₃	H	H	Fp: 171°C